



Application Note AN-NIR-113

異性体中の研究用オクタン価 (RON) 定量

NIRS offers users fast, efficient analysis with low running costs

軽質ナフサ異性化は、製油所が現在のガソリン仕様に適合する高オクタン異性体生成物を生成するために使用されます。異性化はパラフィン分子の分岐度を増すことにより軽質ナフサのオクタン価を増大させる。標的生成物の研究用オクタン価(RON)は、種々のプラント生産パラメータ(例えば、温度または水素対炭化水素比)に依存します。

プラントプロセスを最適化するためには、信頼性が高く迅速な分析法が鍵となります。異性体中のRONを決定する標準的な方法は、高価でメンテナンス集約的なエンジンです。これとは対照的に、研究用オクタン価は近赤外分光法(NIRS)でも分析できます。NIRSは、試料調製や化学薬品を必要とすることなく、1分以内の正確な結果を提供します。

実験装置

メトロームDS2500液状アナライザー(Fig.1)を用いて、400~2500nmの全波長領域にわたり、RONを変化させた63種類の異性試料を透過型測定しました。内蔵された温度コントローラーにより、35 ° Cの一定のサンプル温度で測定の安定性が確保されまし

た。便宜上、8mmの光路長を有する使い捨てバイアルを使用し、洗浄手順を旧式にしました。メトロームのビジョンエアコンプリートソフトウェアパッケージは、データアキュイジションと予想モデル作成に使用されました。

表1:ハードウェアおよびソフトウェア機器の概要

装置	製品番号
DS2500 Liquid Analyzer	2.929.0010
DS2500 Holder 8 mm vials	6.7492.020
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

実験装置



図1. メトロームDS2500リキッドアナライザー 異性体ガソリンサンプル中のリサーチオクタン価（RON）の定量が可能

結果

得られたVis-NIRスペクトル(図2)を用いて、アイソメレート中の研究用オクタン価の定量化の予測モデルを作成しました。交差検証アルゴリズムに基づく相関図を用いて予測モデルの品質を評価しました。

R2の数値>0.98は、VisNIR予測と参照ASTM法との間に高い相関を示します。それぞれの性能指数(FOM)は、ルーチン分析中に予想される精度を表示します(図3)。

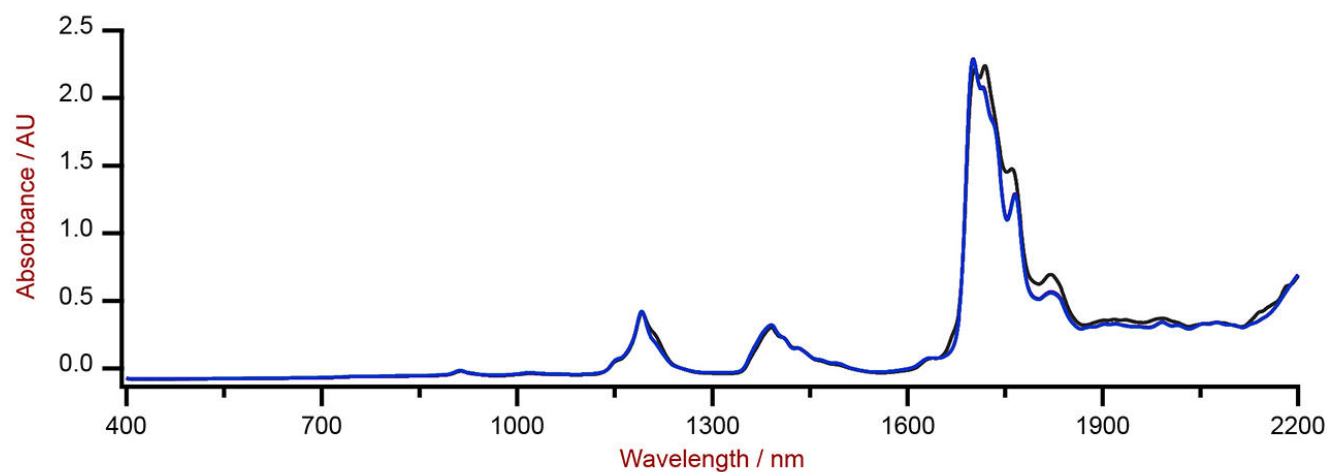


図2. DS2500液体用アナライザーで分析した異性体試料のVis-NIRスペクトルの8ミリバイアルによる選択

結果:RON(オクタン価)

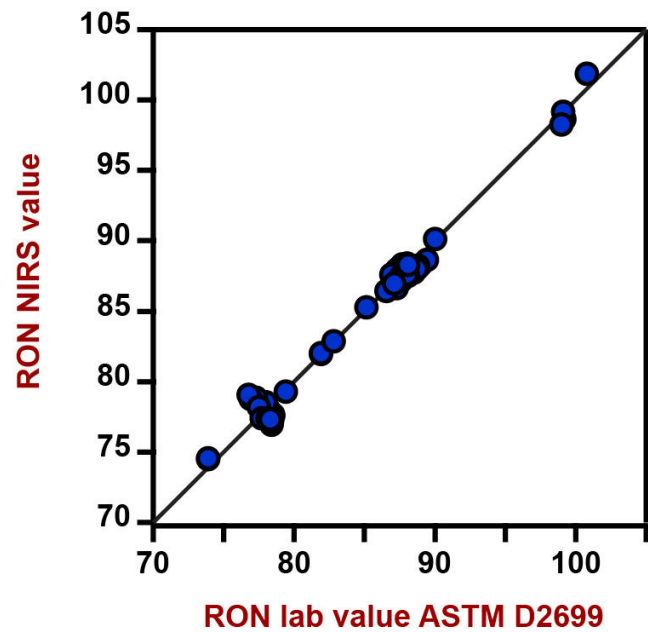


図3. 図3. DS2500リキッドアナライザーを用いたRONの検量線相関図とその各種統計値（FOM）。従来分析値はASTM D2699に従って測定しました。

各種統計値(FOM)	数値
R ² (寄与率)	0.986
検量線標準誤差(SEC)	0.73
相互検証標準誤差(SECV)	0.76

結論

このアプリケーションノートでは、異性化ガソリン中のRON(オクタン価)の測定が近赤外(NIR)分析法で可能かを検証しました。従来分析手法(CFRエンジン

テスト)と比較して、結果が得られるまでの時間が近赤外 (NIR) 分析法は1分以内と圧倒的に短いということが分かりました (表2)。

表2: 標準参照法ASTM D2699によるRON値の測定結果までの時間

測定項目	分析手法	測定結果が得られるまでの時間
RON(オクタン価)	CFR engine test	~30 分/サンプル

CONTACT

メトロームジャパン株式会
社
143-0006 東京都大田区平
和島6-1-1
null 東京流通センター アネ
ックス9階

metrohm.jp@metrohm.jp

装置構成



DS2500 Liquid Analyzer

Robust near-infrared spectroscopy for quality control, not only in laboratories but also in production environments. The DS2500 Liquid Analyzer is the tried and tested, flexible solution for routine analysis of liquids along the entire production chain. Its robust design makes the DS2500 Liquid Analyzer resistant to dust, moisture and vibrations, which means that it is eminently suited for use in harsh production environments. The DS2500 Liquid Analyzer covers the full spectral range from 400 to 2500 nm, heats samples up to 80° C and is compatible with various disposable vials and quartz cuvettes. The DS2500 Liquid Analyzer is thus adaptable to your individual sample requirements and helps you obtain accurate and reproducible results in less than one minute. The integrated sample holder detection and the self-explanatory Vision Air Software also ensure simple and safe operation by the user. In the case of larger-sized sample quantities, productivity can be considerably increased by using a flow-through cell in combination with a Metrohm sample robot.



8mmDS2500

直径8 mmのガラス製使い捨てバイアル用インテリジェントホルダー



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - 汎用性に優れた分光法ソフトウェア。

Vision Air Complete は、規制環境下での使用のための、操作の容易な最新のソフトウェアソリューションです。

Vision Air の利点の概要:

- 調整済みのユーザーインターフェースを伴う個別のソフトウェアアプリケーションにより、直観的かつ容易な操作が保証されます。
- 作業手順の容易な作成およびメンテナンス
- 安全かつ容易なデータ管理のための SQL データベース

バージョン Vision Air Complete (66072208) には、可視近赤外分光法を用いた品質管理のための全てのアプリケーションが含まれています:

- 装置管理およびデータ管理のためのアプリケーション
- メソッド開発のためのアプリケーション
- ルーチン分析のためのアプリケーション

その他の Vision Air Complete ソリューション:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)